**Якуцени, Павел Павлович.**

## Прямая задача спектроскопии ЯМР молекул, ориентированных в жидких кристаллах : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.03. - Ленинград, 1984. - 85 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Якуцени, Павел Павлович

Введение

1. ямр спектроскопия молекул, ориентированных в жвдких кржталлах.

1.1. Спектры ЯМР молекул, ориентированных в жидких кристаллах

1.2. Определение структуры и ориентации растворенных молекул.

1.3. Методика интерпретации получаемых результатов и корректность решения обратной задачи.

1.4. О возможности решения прямой спектральной задачи

2. методика и техника эксперимента.

2.1. Требования к образцам и особенности их приготовления

2.2. Обоснование выбора объектов исследования

2.3. Использованная при проведении расчетов и постановке экспериментов, аппаратура.

2.4. Особенности получения спектров ЯМР ориентированных молекул.

3. разработка методов решения прямой задачи.

3.1. Расчет энергии внутри- и межмолекулярных взаимодействий

3.2. Особенности расчета конформацпи изолированных молекул

3.3. Метод теоретического моделирования ориентации растворенных в ЗЕК молекул.

3.4. Учет влияния анизотропной среды на конформацию растворенных молекул.

3.5. Расчет констант прямого диполь-дипольного взаимодействия

4. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛ, РАСТВОРЕННЫХ В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ\* РЕЗУЛЬТАТИВНОСТЬ МЕТОДА РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ СПЕКТРОСКОПИНЕСКОИ ЗАДАЧИ.

4.1. Спиновая системы ^ Определение геометрии и ориентации

О 1 л'»"\*'" Т->-п/ (—

4.2. Пример молекулы, имеющем спиновую систему типа АААА ВВ

4.3. Спиновая система типа А^Вд. Пример гибкой молекулн.

4.4. Исследование высоко спиновых мезогенных молекул.

4.5. Прямая спектральная задача и применение молекулярных зондов в исследовании жидких кристаллов.

4.6. Обсуждение основных результатов . 70'